GeneSpring MS を使用した GC/MS データ解析の紹介

＜要旨＞　、Agilent が提供する世界標準のマイクロアレイ解析ソフトウェア GeneSpring GX の使いやすさと強力な統計解析機能を、メタボロミクスやプロテオミクス研究においてもご利用いただけるよう、GeneSpring MS がリリースされました。GeneSpring MS は LC/MS や GC/MS のデータを簡単にインポートして解析することができ、バイオマーカー探索などで威力を発揮することが期待されています。

今回は、食品分析の適用例として、国内の市販ビール 4 種類を Twister で抽出した測定したデータを用いて、GeneSpring MS にて解析した例をご紹介します。

Key Words: Twister、SBSE、GeneSpring MS、多変量解析、GC/MS

＊ ＊ ＊ ＊ ＊ ＊ ＊

1. はじめに

GeneSpring MS(GS-MS)は、メタボロミクスやプロテオミクスの研究においてバイオマーカーの検索などで威力を発揮する統計解析ツールを一つにまとめ、さらに見やすさと使いやすさを提供する、統合解析ソフトウェアです。GS-MS は LC/MS や GC/MS といった化学分析装置のデータを取り扱うことができ、食品の開発研究や品質管理などへの応用が期待されております。

今回は銘柄の異なる 4 種類のビールに対して Twister による SBSE(Stir Bar Sorptive Extraction)法で抽出を行いました。Twister で抽出した成分は熱脱着装置を用いて Agilent GC/MS に導入し測定しました。銘柄による違いを GS-MS で検討し、そして測定データを解析しました。

2. GS-MS、GC/MS のデータ解析ワークフロー

GS-MS を使用した GC/MS のデータ解析のワークフローを図 1 に示します。

図 1 GS-MS を使用した GC/MS のワークフロー

GC/MS データは GS-MS で読み込める形のファイル(.ELU/.FIN 形式)に変換された後、GS-MS へ取り込みます。GS-MS で統計処理を行いながら、各成分の MS スペクトルの確認や、ライブラリサーチによる化合物の推定を MSD ケミステーションで行います。

2. GS-MS の解析

GS-MS では GC/MS データのリテンションタイムと検出されたイオン(m/z)の双方の情報を取り扱います。そのため、同じイオンであってもリテンションタイムが異なる場合は、異なるものとして認識し処理されます。より確実な解析を行うためにも、Agilent GC/MS のリテンションタイムロッキングで、各データのリテンションタイムを合わせることが必要です。GS-MS では、クラスタ分析(図 2)の他にも主成分分析(図 3)などを行うことができ、各銘柄間の違いや、銘柄に特徴的なイオンを確認することができます。

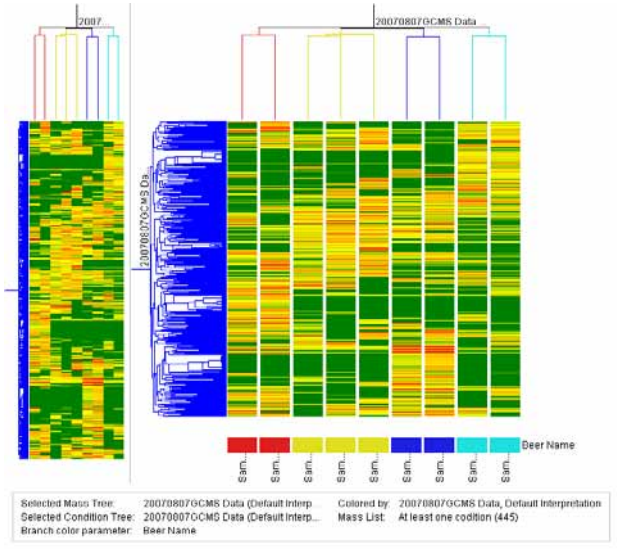

図 2 ビール抽出試料のクラスタ分析

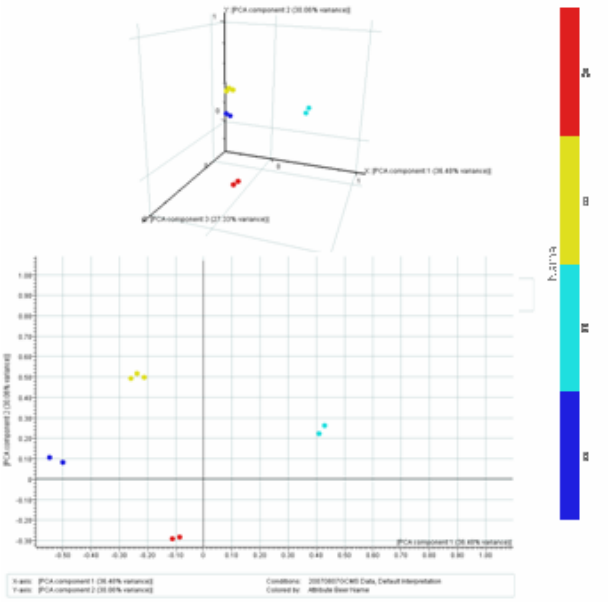

図 3 主成分分析(PCA)

統計検定（ANOVA、t-test、 volcano plot）や、クラスタリング解析 （階層型クラスタリング、SOM、QT clustering、SVM）などの解析ツールを駆使したデータ解析結果を、直感的に分かりやすく視覚化することができます。

3．MSD ケミステーションとの組み合わせ

階層型クラスタリングで確認した特徴的なイオンを MSD ケミステーションでデータ解析を行うことで、特徴的な成分の推定を行うことができます。
図 4 の例では Beer D で顕著に現れている 25.024 分の m/z 104 のイオンを確認することができます。

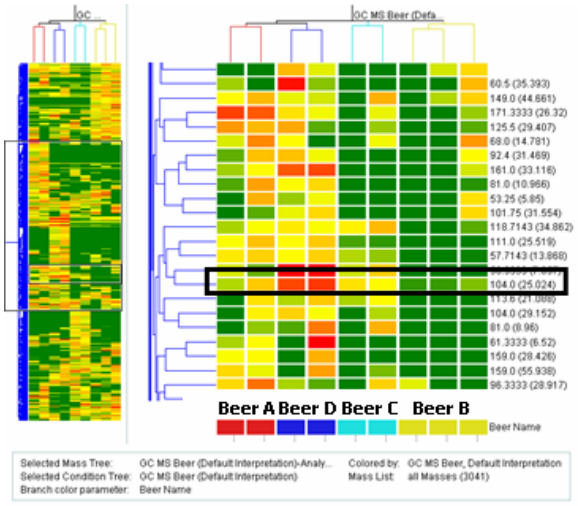

図 4 ビール抽出物データのクラスタ解析

MSD ケミステーションにて抽出イオンクロマトグラム(EIC)を確認してみると、図 5 のようになり、ライブラリサーチを実行することで、この成分の推定を行うことができます。(図 6)

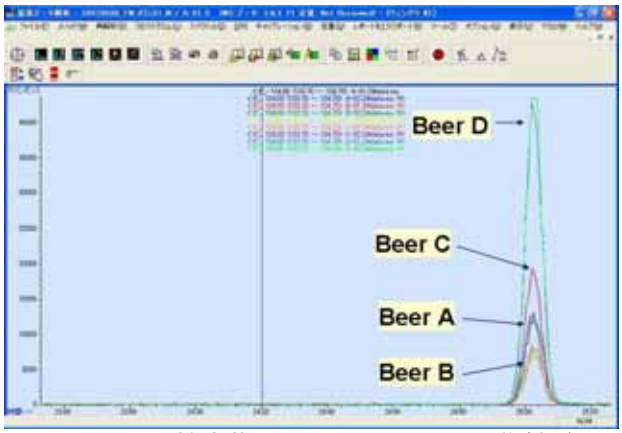

図 5 ビール抽出物の EIC（m/z104、25 分付近）

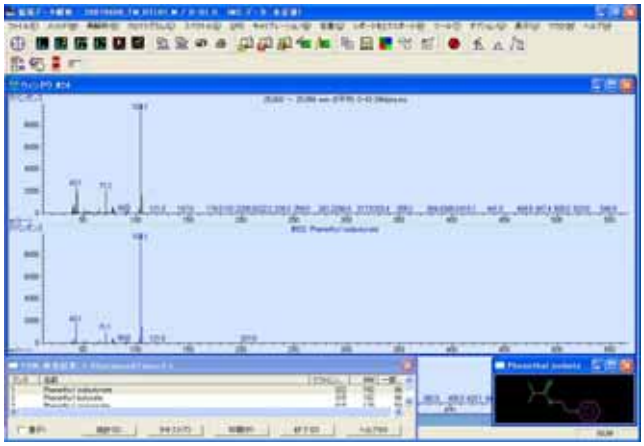

図 6 ライブラリサーチ結果

4．まとめ

GS-MS に搭載されている様々な解析ツールを駆使することで大規模で複雑な実験データから学術的・商業的に価値の高い発見を効率的に行うことが可能となります。

【MS-200708-001】

本資料に記載の情報、説明、製品仕様等は予告なしに変更することがあります。

アジレント・テクノロジー株式会社
〒192-8510 東京都八王子市高倉町 9-1
www.agilent.com/chem/jp

Agilent Technologies